



TITLE:

ディスカッションにて(複雑な多谷
ポテンシャルエネルギー面上で生
起する動力学諸問題-タンパク質と
その周辺-,研究会報告)

AUTHOR(S):

小西, 哲郎

CITATION:

小西, 哲郎. ディスカッションにて(複雑な多谷ポテンシャルエネルギー
面上で生起する動力学諸問題-タンパク質とその周辺-,研究会報告). 物
性研究 2006, 86(1): 106-106

ISSUE DATE:

2006-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110426>

RIGHT:

ディスカッションにて

小西哲郎

名古屋大学理学部物理 R 研

tkonishi@r.phys.nagoya-u.ac.jp

<http://jegog.phys.nagoya-u.ac.jp/~tkonishi/research/>

(以下はディスカッションの時間のネタ振りに少し話したことを要約したものです。)

この研究会は、

- 化学反応理論
- 時系列解析
- 非線型動力学

などをもとに、タンパク質など生体分子(など)の面白くて重様な性質を実験、シミュレーション、理論の様々な立場・視点から議論しようというねらいの意欲的な研究会である。

研究会での話を聞いていて印象的だったのは、単に構造を決めるだけではなく、時間の入った現象(たとえば機能発現の流れ)に光が当てられつつあることであった。また、そこでは、現象にかかわる物質が同定されて一件落着、と言うのとは異なるシナリオが語られているようでもあった。そこで理論なり何なりが必要とされるのであるが、これは既存の方法(たとえば非線型動力学であればリャプノフ解析など)を当てはめて現象を他の分野の耳新しい言葉で言い替えれば事足りる、なんてことはあるはずがない。今後は、

- タンパクや生体システムの理解に役立つ物理、化学、…
- タンパクや生体システムの理解に触発された物理、化学、…

の両方が興味深い。

その意味で、今回の発表では、NHIM, reaction path などの新しい概念、手法の他、柴田、古澤、原田の各氏の講演が、非線型動力学として新しい内容を含んでいるようでとても興味深く思われた。(詳しくはこの研究会報告を参照されたい。)

また、別のアプローチとしては、大規模計算がある。これまでは分子系で大規模計算なんて夢と思っていたのだが、いよいよ具体的にいろいろ試すことが出来る段階になって来たようである。大規模計算と言えば、天体力学の分野でも大きな発展があり成果が得られているようである。実験が出来ない天体現象における大規模計算とは違って、分子系では実験も可能なので、タンパクなど生体高分子系での大規模計算はまた天体とは違った意味で大きな実りをもたらすのではないだろうか。

文末であるが、研究会の企画・運営にあたられた世話人のかたがた他のみなさんにお礼を申し上げます。ありがとうございました。